

修 士 論 文 の 和 文 要 旨

研究科・専攻	大学院 情報理工学研究科 知能機械工学専攻 博士前期課程		
氏 名	花田 俊匡	学籍番号	1032075
論 文 題 目	第一原理計算による半導体二次元構造の解析		
<p>要 旨</p> <p>近年グラフェンを中心に二次元構造体の研究が盛んに行われている。グラフェンとは炭素原子が六角形に並んだ 1 原子層からなる物質である。2004 年 に初めて実験で単層分離に成功した。グラフェンは室温での量子ホール効果や、優れた電荷輸送特性を有している。これらの特徴から次世代のエレクトロデバイスへの応用を目的に研究されている。グラフェンをチューブ状に巻いたカーボンナノチューブという物質もあり、これもグラフェン同様に研究されている。グラフェンがこの特異な性質を有している要因は厚さが 1 原子層であり、原子が六角形に並んでいる形状にある。この特殊な形状はグラフェン以外でも存在するのではないかと考えられ、さまざまな原子で研究が行われている。</p> <p>Ciraci ら IV 族や III-V 族原子に対する研究を行っており、Si や Ge のような IV 族の原子についてはグラフェン同様の電気特性を有していることを発見した。これらの研究によりグラフェン以外にもエレクトロデバイスに応用できる原子種があることが期待できる。</p> <p>本研究では、第一原理計算を用いた構造緩和計算により、Si、SiC の二次元構造の安定な構造を求める。次にリボン状 Si、SiC の電子的特性が端の形状や、付加原子の種類にどのように依存するのかについて研究をした。</p> <p>シミュレーションの結果より、Si の二次元構造に対してはフラットな構造よりも、面外に変形した構造のほうが自由エネルギーが低く、Si は単原子層で存在する場合には面外に変形している構造で存在すると考えられる。Si ナノリボンはほとんどエネルギーギャップのない半導体である。一部の端がジグザグの Si ナノリボンは金属的な性質を見せるものが存在した。SiC ナノリボンは半導体の性質を有している。ナノリボン構造においてはエネルギーギャップはリボンの幅や端の構造に依存する。原子配置の幾何学的変化によってエネルギーギャップは変化し、水素終端における原子の付加によっても変化することが明らかになった。</p>			